THEME 4 : Enoncés des exercices

Création : juin 2003

Dernière modification : sept 2005

OBJECTIFS :

Représentation des Opérations de Symétrie

Utilisation du Programme LEPAGE

LISTE des EXERCICES

T4_01 : Représentation matricielle des rotations d'ordre 3

T4_02 : Identification d'une opération de symétrie à partir de sa représentation matricielle

T4_03 : Opérations de symétrie d'ordre 4.

T4_04 : Représentation de Seitz _ Bauer , représentation matricielle des opérations de symétrie d'ordre 6 avec glissement c/2 .

T4_05 : Dénombrement des opérations de symétrie compatible avec un réseau de translation.

T4_06 : Réduction d'une maille cristalline Programme LEPAGE

EXERCICE T4_01 : Représentation MATRICIELLE des rotations d'ordre 3

1 - : Ecrire la matrice (A) représentant une rotation d'ordre 3 agissant autour de la direction [1 1 1] d'une maille **rhomboédrique** (a b c)

2 - : Même question pour une rotation d'ordre 3 agissant autour de la direction

[0 0 1] d'une maille **hexagonale** (a b c)

3 - : Même question pour une rotation d'ordre 3 agissant autour de la direction

[1 -1 1] d'une maille **cubique** (a b c).

4 - : Reprendre les questions précédentes. Retrouver la direction de l'élément de symétrie en déterminant le vecteur propre de la transformation associée à la valeur propre **+1**

EXERCICE T4_ 02 : Identification d'une opération de symétrie à partir de sa représentation matricielle.

La matrice $(A)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ est associée à une opération de symétrie **sans** glissement.

1 - : Identifier l'opération de symétrie qu'elle représente

2 - : Indiquer la base dans laquelle elle est rapportée

EXERCICE T4_03 : Opérations de symétrie d'ordre 4.

On considère la maille (a,b,c) d'un réseau quadratique et le groupe cyclique engendré par la rotation d'ordre 4 directe, autour d'un axe parallèle à [0 0 1] et passant par l'origine.

1 - : Indiquer les coordonnées des points équivalents à un point de coordonnées (x, y z) de la maille obtenus par action de l'opération directe d'ordre 4.

2 - : L'unité asymétrique du motif est composée d'un atome situé en **x = 0,25 y = 0, 33 z = 0**
Construire le **motif** en faisant agir les opérations de symétrie du groupe cyclique sur la position de l'unité asymétrique. Représenter les points équivalents en projection sur le plan (a,b) .

Vérifier, à partir de ces positions, que les opérations du groupe entraîne la présence de rotations d'ordre 4 et 2 autour d'axes parallèles à [0 0 1], respectivement au centre de la maille et au centre des axes a et b .

3 - : Ecrire les matrices représentant les axes quaternaire et binaire respectivement décalés au centre et au milieu de l'axe b de la maille.

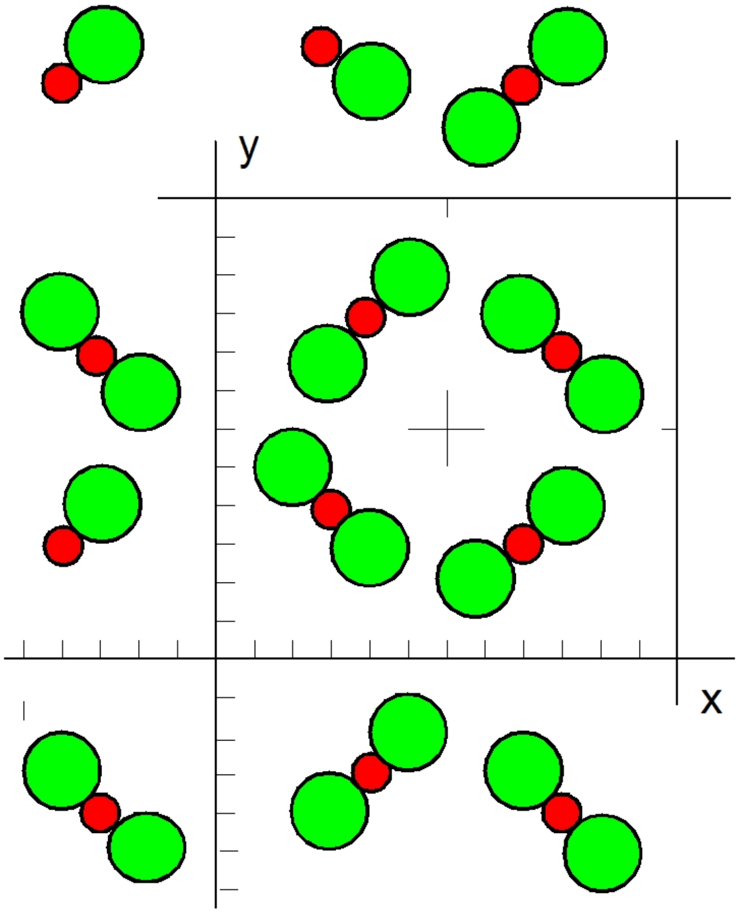

Figure T4_03 : Modèle de structure présentant la symétrie directe d'ordre 4

4 - : Déterminer les coordonnées des positions équivalentes générées par l'application de l'axe A_4 décalé en (½ ½ 0) sur un point (x,y,z) de la maille. Vérifier, Fig. T4_03, que les atomes ''rouges'', ''verts(1)'' et ''verts(2)'' occupent des positions équivalentes.

5 - : Caractériser l'unité asymétrique de la maille et le motif.

EXERCICE T4_ 04 : Opérations de symétrie avec glissement

On considère la maille (a,b,c) du système hexagonal et le groupe cyclique engendré par les rotations **d'ordre 6** autour de [0 0 1] avec **glissement c/2** .

1 - : Donner leur représentation de Seitz_ Bauer

2 - : Indiquer maintenant leur écriture matricielle rapportée à la base de réseau hexagonale .

Indiquer les coordonnées x' y' z' des atomes équivalents à un atome situé en position générale de coordonnées x y z .

EXERCICE T4_ 05 : : Dénombrement des opérations de symétrie compatible avec un réseau de translation

Soit (A) une matrice représentant une opération de symétrie, elle satisfaisant à la relation d'invariance du tenseur métrique :

$$(G) = (A)^t (G) (A$$

Inversement, toute matrice laissant le tenseur métrique invariant représente une opération de symétrie compatible avec la base cristallographique associée au tenseur métrique. On peut dénombrer ainsi les opérations de symétrie compatibles avec chacun des 7 systèmes cristallins.

***Référence** : Cliquer sur la rubrique ‘’ Cristallographie appliquée ‘’ de la page d’accueil*

Afficher ensuite la page : Représentation des opérations de symétrie

Aller au chapitre 7, paragraphe 7.4.1

Pour des raisons de simplicité, on se limitera aux cas suivants :

1 - : Système orthorhombique

2 - : Système quadratique

3 - : Système cubique

EXERCICE 07_ 06 : Réduction d’une maille cristalline

Le programme d’indexation d’un diffractomètre automatique pour monocristaux propose une maille **monoclinique** de paramètres :

a = 0,6331 nm b = 0,7415 nm c = 0,9323nm β = 109,83 deg.

Les incertitudes relatives sont de 2/1000 sur **a, b, c**. L’incertitude absolue est de 0,06 deg sur β

La réduction de maille consiste à trouver une maille mieux adaptée aux symétries du réseau cristallin.

1 - : Construire le plan réticulaire de la famille (0 k 0) passant par l’origine , en indiquant la position (u, v, w) des noeuds. On se limitera à u et w ∃ [-2, +2].

2 - : Déterminer l’opération de symétrie que représente la matrice $(A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Indiquer la valeur de **cos** β pour laquelle cette opération de symétrie est compatible avec une base de réseau monoclinique.

3 - : Vérifier numériquement que la maille proposée peut être réduite.

4 - : Déterminer les indices u v w de la rangée orthogonale aux axes a et b . Indiquer l’élément de symétrie que cette rangée porte.

5 - : Ecrire la matrice de transformation de la maille monoclinique. Caractériser la maille

(A, B, C) et calculer ses paramètres.

6 - : Programme **LEPAGE** :

Introduire les paramètres (en A°) de la maille monoclinique dans le fichier d’entrée et lancer le programme.

Parmi les mailles proposées, rechercher celles qui ont le plus petit volume et qui sont les plus symétriques